

ФЕДЕРАЛЬНОЕ АГЕНТСТВО НАУЧНЫХ ОРГАНИЗАЦИЙ

**Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Новосибирский институт органической химии им. Н.Н. Ворожцова
Сибирского отделения
Российской академии наук (НИОХ СО РАН)**

УТВЕРЖДАЮ

Врио директора НИОХ СО РАН,
д.ф.-м.н., проф.

_____ Е.Г. Багрянская

« ____ » _____ 201__ г.

Вычислительные методы в органической химии

**Модульная программа лекционного курса, семинаров и
самостоятельной работы аспирантов**

Направление подготовки 04.06.01 «Химические науки»

Учебно-методический комплекс

Учебно-методический комплекс предназначен для аспирантов Новосибирского института органической химии им. Н.Н. Ворожцова Сибирского отделения Российской академии наук, направление подготовки 04.06.01 «Химические науки». В состав пособия включены: программа курса лекций, структура курса, набор задач для самостоятельной работы аспирантов с использованием учебной литературы и персонального компьютера и даны примеры вариантов заданий, предлагаемых для самостоятельного решения в прошлые годы.

Составитель: проф., д.х.н. А.В.Ткачев

Аннотация рабочей программы

Дисциплина «Вычислительные методы в органической химии» относится к вариативной части (профильные дисциплины) высшего профессионального образования (аспирантура) по направлению подготовки 04.06.01 «Химические науки» (Исследователь. Преподаватель-исследователь). Данная дисциплина реализуется в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Новосибирском институте органической химии им. Н.Н. Ворожцова Сибирского отделения Российской академии наук (ИНХ СО РАН).

Курс построен по оригинальной схеме, заключающейся в поэтапном овладении базовыми знаниями в области компьютерных технологий и навыками работы с самыми современными программными средствами, а структура курса отражает области применения вычислительных методов в современных химических исследованиях. Актуальность курса связана с тем, что компьютерные технологии широко используются для решения самых разнообразных задач, возникающих перед химиками, и овладение приемами решения таких задач совершенно необходимо для успешной профессиональной деятельности.

Дисциплина нацелена на формирование у выпускника, освоившего программу аспирантуры, универсальных компетенций УК-1, УК-2, УК-3, УК-4, УК-5, общепрофессиональных компетенций ОПК-1, ОПК-2, ОПК-3.

Формы организации учебного процесса: лекция, семинар и самостоятельная работа обучающегося. Формы контроля успеваемости: домашние задания, дифференцированный зачет.

В основе преподавания спецкурса «Вычислительные методы в органической химии» лежит классическое лекционное обучение по заранее составленной программе с элементами обучения с помощью учебной книги, компьютерного обучения и обучения с помощью аудиовизуальных технических средств. С точки зрения технологии преподавания в учебном процессе во многом реализуется личностно-ориентированная технология обучения как учебного исследования.

В ходе прохождения курса «Вычислительные методы в органической химии» аспирантам даются сведения об общих принципах обработки информации с использованием компьютеров и компьютерных систем, о возможностях современных телекоммуникационных средств, о программных средствах, применяемых для решения разнообразных химических задач, обработки химической и физико-химической информации; демонстрируются примеры использования компьютеров в различных областях химических исследований. Для закрепления знаний и приобретения практических навыков аспирантам предлагается самостоятельно освоить ряд специальных программ и с их помощью решить ряд постановочных задач и реальных проблем, возникающих в ходе собственных исследований, проводимых аспирантами при выполнении курсовых работ.

В этой связи курс нацелен не столько на овладение знаниями об огромном массиве прикладных программ для решения множества конкретных задач, сколько на знакомство с общими подходами и методами их решения.

В качестве самостоятельной работы обучающимся предлагается разобраться с рядом вопросов, связанных с особенностями программного обеспечения, используемого для решения тех или иных задач, с некоторыми теоретическими аспектами проблем, решение которых требует применение вычислительной техники. Для этого на лекционных занятиях обозначаются проблемы для самостоятельного рассмотрения, даются необходимые методические указания и перечень литературных источников и обсуждаются ключевые слова и фразы для самостоятельного поиска недостающих материалов в глобальной компьютерной сети.

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 зачетные единицы (108 академических часов). Программой дисциплины предусмотрены 32 часа лекционных

занятий, 8 часов семинаров, 20 часов самостоятельной работы и 48 часов для выполнения домашних заданий.

1. Цели освоения дисциплины

Основной целью освоения курса «Вычислительные методы в органической химии» является приобретение учащимися навыков использования современной вычислительной техники и современных программных комплексов для решения исследовательских задач современной органической химии и в смежных областях.

2. Место дисциплины в структуре основной образовательной программы (ООП)

Дисциплина «Вычислительные методы в органической химии» относится к вариативной части блока 1 структуры программы аспирантуры по направлению подготовки 04.06.01 «Химические науки» (Исследователь. Преподаватель-исследователь).

Дисциплина «Вычислительные методы в органической химии» опирается на следующие дисциплины:

- органическая химия (современная теория строения молекул, свойства основных классов органических веществ, представления об установлении строения молекул органических веществ, физические методы исследования в органической химии);
- физическая химия (строение и свойства атома, природа химической связи, химическая реакция, понятия о кинетике и термодинамике реакций, кислотно-основные равновесия);
- неорганическая химия (строение и свойства атомов, строение молекул, химическая связь);
- основы компьютерной грамотности (навыки обращения с ПК);
- Компьютерное моделирование процессов и явлений физической химии (ТВС);
- Поиск химической информации в научно-технических базах данных.

Результаты освоения дисциплины «Вычислительные методы в органической химии» используются в следующих дисциплинах:

- Научно-исследовательская практика;
- Итоговая государственная аттестация.

3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины

В результате освоения дисциплины «Вычислительные методы в органической химии» у обучающегося формируются следующие компетенции:

Универсальные компетенции:

- способность к критическому анализу и оценке современных научных достижений, генерирование новых идей при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях (УК-1);
- способность проектировать и осуществлять комплексные исследования, в том числе междисциплинарные, на основе целостного системного научного мировоззрения с использованием знаний в области истории и философии науки (УК-2);
- готовность участвовать в работе российских и международных исследовательских коллективов по решению научных и научно-образовательных задач (УК-3);
- готовность использовать современные методы и технологии научной коммуникации на государственном и иностранном языках (УК-4);
- способность планировать и решать задачи собственного профессионального и личностного развития (УК-5).

Общепрофессиональные компетенции:

- способность самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в

- готовность организовать работу исследовательского коллектива в области химии и смежных наук (ОПК-2);
- готовность к преподавательской деятельности по основным образовательным программам высшего образования (ОПК-3).

В результате освоения дисциплины обучающийся должен:

- иметь представление об основных аспектах правового регулирования в сфере информационных технологий, о принципах функционирования компьютерных сетей и способах обмена информацией, о методах защиты информации и каналов связи; о способах проектирования и создания гипертекстовых документов для размещения в компьютерных сетях;
- знать приёмы теоретического расчёта геометрии молекул, основы математической обработки данных молекулярной радиоспектроскопии, основные приёмы, методы и средства подготовки научно-технической информации;
- уметь выполнять компьютерную обработку спектральных данных (одномерные и двумерные спектры ЯМР, спектры ЭПР), проводить расчёты геометрии молекул с использованием различных программных средств разными методами.

4. Структура и содержание дисциплины

Курс построен по оригинальной схеме, заключающейся в поэтапном овладении базовыми знаниями в области компьютерных технологий и навыками работы с самыми современными программными средствами, а структура курса отражает области применения вычислительных методов в современных химических исследованиях.

Актуальность курса связана с тем, что компьютерные технологии широко используются для решения самых разнообразных задач, возникающих перед химиками, и овладение приёмами решения таких задач совершенно необходимо для успешной профессиональной деятельности.

Формы организации учебного процесса: лекция, семинар и самостоятельная работа обучающегося. Формы контроля успеваемости: домашние задания, дифференцированный зачёт.

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 зачетные единицы (108 академических часов). Программой дисциплины предусмотрены 32 часа лекционных занятий, 8 часов семинаров, 20 часов самостоятельной работы и 48 часов для выполнения домашних заданий.

Раздел дисциплины	Виды учебной работы, включая самостоятельную работу аспирантов и трудоемкость (в часах)				Формы текущего и промежуточного контроля успеваемости)
	Лекции	Семинары	Самост. работа	Домашние задания	
тема 1: «Устройство и функционирование компьютерных сетей»	6	2	4	4	Домашние задания
тема 2: «Компьютерная верстка научно-технической документации»	4	2	4	10	Домашние задания
тема 3: «Компьютерная графика в химии»	8	2	4	6	Домашние задания

тема 4: «Компьютерная обработка данных молекулярной радиоспектроскопии»	12		4	16	Домашние задания
Тема 5: «Основы <i>web</i> -программирования»	2	2	4	12	Домашние задания
					Дифф.зачёт
Всего:	32	8	20	48	

4.1. Рабочий план

- Лекция 1. «Правовое регулирование в сфере информатизации»
 Лекция 2. «Передача данных в компьютерных сетях»
 Лекция 3. «Защита информации в компьютерных системах»
 Семинар 1. Сетевые сервисы *ИНТРАНЕТ* для обеспечения научных исследований (на примере локальной вычислительной сети НИОХ СО РАН).
 Лекция 4. «Текстовые редакторы и тестовые процессоры»
 Семинар 2. Базовые приёмы работы с текстовыми процессорами при подготовке научно-технической документации.
 Лекция 5. «Настольные издательские системы и библиографические базы данных»
 Лекция 6. «Растровая и векторная графика в научных исследованиях и образовании»
 Лекция 7. «Компьютерное моделирование молекулярных структур»
 Семинар 3. «Расчёт геометрических параметров молекул»
 Лекция 8. «Химическое рисование»
 Лекция 9. «Визуализация рентгеноструктурного эксперимента».
 Лекция 10. «Математические основы регистрации и обработки данных радиоспектроскопии»
 Лекция 11. «Многоимпульсные методы спектроскопии ЯМР: генерирование, регистрация и обработка сигналов»
 Лекция 12. «Многомерные эксперименты ЯМР»
 Лекция 13. «Особенности математической обработки и анализа данных различных вариантов двумерной спектроскопии ЯМР»
 Лекция 14. «Симуляция спектров ЯМР в анализе сильносвязанных спиновых систем»
 Лекция 15. «Симуляция спектров ЭПР и анализ структуры радикальных частиц»
 Лекция 16. «Проектирование и создание *web*-интерфейсов для химически ориентированных сайтов и *web*-приложений»
 Семинар 4. создание и отладка *web*-страниц средствами удалённого доступа.

4.2. Программа курса лекций

тема 1: «Устройство и функционирование компьютерных сетей»

- Лекция 1. «Правовое регулирование в сфере информатизации»
 Основные аспекты правового регулирования, перечень законодательных актов РФ, международные конвенции, ответственность; киберэтика, информационная этика
 Лекция 2. «Передача данных в компьютерных сетях»
 Особенности цифровой связи, каналы передачи данных, общие представления о компьютерных сетях, уровни взаимодействия компьютеров (физический, канальный, сетевой, транспортный, сеансовый, уровень представления, прикладной), горизонтальная и вертикальная модели, обзор протоколов.
 Лекция 3. «Защита информации в компьютерных системах»
 Проблемы защиты информации в компьютерных системах, классификация угроз, методы и средства защиты данных, методы и средства защиты каналов связи.

Семинар 1. Сетевые сервисы *ИНТРАНЕТ* для обеспечения научных исследований (на примере локальной вычислительной сети НИОХ СО РАН).

Организация общего доступа к библиотечным ресурсам, спектральным данным, почтовым службам, файлообменникам, организация групп пользователей по подразделениям и категориям, автоматизация размещения клиентских спектральных данных, организация корпоративной защиты, взаимодействие Интернет–Интранет.

тема 2: «Компьютерная верстка научно-технической документации»

Лекция 4. «Текстовые редакторы и тестовые процессоры»

Программные комплексы для подготовки документации (текстовые редакторы и текстовые процессоры); технология WYSIWYG – достоинства и недостатки.

Семинар 2. Базовые приёмы работы с текстовыми процессорами при подготовке научно-технической документации.

Основные возможности текстовых процессоров для подготовки сложных мультязыковых документов с включением различных объектов и изображений, возможности автоматизации оформления; использование незадокументированных возможностей программного обеспечения.

Лекция 5. «Настольные издательские системы и библиографические базы данных»

Проблема подготовки научно-технической документации большого объёма, возможности компьютерной вёрстки на примере системы TeX, создание и использованием библиографических баз данных.

тема 3: «Компьютерная графика в химии»

Лекция 6. «Растровая и векторная графика в научных исследованиях и образовании»

Растровая и векторная графика – форматы, особенности, достоинства и недостатки, сферы использования, обзор специализированного программного обеспечения для работы с графикой.

Лекция 7. «Химическое рисование»

Построение изображений для научно-технической документации – трёхмерные модели структуры – статические и анимированные, схемы, графики, диаграммы, спектры, химические аппараты и лабораторное оборудование.

Лекция 8. «Компьютерное моделирование молекулярных структур»

Обзор программного обеспечения для работы с трёхмерными моделями молекул.

Семинар 3. «Расчёт геометрических параметров молекул»

Обзор методов расчёта геометрии молекул, достоинства и недостатки различных методов расчёта – неэмпирических, полэмпирических, неэмпирических расчётов и расчётов методом DFT; проблемы выбора.

Лекция 9. «Визуализация рентгеноструктурного эксперимента».

Обзор специализированного программного обеспечения для обработки данных рентгеноструктурного эксперимента; анализ геометрии молекулярных и супрамолекулярных систем; сопоставление геометрических параметров молекул, получаемых экспериментальными и расчетными методами.

тема 4: «Компьютерная обработка данных молекулярной радиоспектроскопии»

Лекция 10. «Математические основы регистрации и обработки данных радиоспектроскопии»

Принципы импульсной ЯМР, аналого-цифровое преобразование, проблемы оцифровки, Фурье-преобразование, частотнозависимый дефект фазы, ширина линии, взвешивающие функции, цифровое разрешение.

Лекция 11. «Многоимпульсные методы спектроскопии ЯМР: генерирование, регистрация и обработка сигналов»

Обзор многоимпульсных методов одномерного ЯМР.

Лекция 13. «Особенности математической обработки и анализа данных различных вариантов двумерной спектроскопии ЯМР»

Основы теории двумерного ЯМР, обзор методов двумерного ЯМР, особенности регистрации и обработки сигналов, приёмы комплексного анализа результатов массива данных ЯМР.

Лекция 14. «Симуляция спектров ЯМР в анализе сильносвязанных спиновых систем»

Классификация спиновых систем, основные принципы анализа сильносвязанных спиновых систем, компьютерная симуляция как метод исследования.

Лекция 15. «Симуляция спектров ЭПР и анализ структуры радикальных частиц»

Интерпретация спектров ЭПР органических свободных радикалов, симуляция спектров ЭПР высокого разрешения как метод анализа сверхтонкой структуры спектров.

тема 5: «Основы *web*-программирования»

Лекция 16. «Проектирование и создание *web*-интерфейсов для химически ориентированных сайтов и *web*-приложений»

Языки и средства *web*-программирования (HTML, XML, CSS, Perl, Parser, PHP, MySQL, Java, JavaScript, CMS). Основные принципы проектирования и создания *web*-интерфейсов для сайтов и *web*-приложений.

Семинар 4. Создание и отладка *web*-страниц средствами удалённого доступа.

Практические приёмы создания гипертекстовых страниц и размещения их для отладки на удалённом сервере с использованием SSH-клиентов.

5. Образовательные технологии

В основе преподавания спецкурса «Вычислительные методы в органической химии» лежит классическое лекционное обучение по заранее составленной программе с элементами обучения с помощью учебной книги, компьютерного обучения и обучения с помощью аудиовизуальных технических средств. С точки зрения технологии преподавания в учебном процессе во многом реализуется личностно-ориентированная технология обучения как учебного исследования.

В ходе прохождения курса «Вычислительные методы в органической химии» аспирантам даются сведения об общих принципах обработки информации с использованием компьютеров и компьютерных систем, о возможностях современных телекоммуникационных средств, о программных средствах, применяемых для решения разнообразных химических задач, обработки химической и физико-химической информации; демонстрируются примеры использования компьютеров в различных областях химических исследований. Для закрепления знаний и приобретения практических навыков аспирантам предлагается самостоятельно освоить ряд специальных программ и с их помощью решить ряд постановочных задач и реальных проблем, возникающих в ходе собственных исследований, проводимых аспирантами при выполнении курсовых работ.

В этой связи курс нацелен не столько на овладение знаниями об огромном массиве прикладных программ для решения множества конкретных задач, сколько на знакомство с общими подходами и методами их решения.

В качестве самостоятельной работы обучающимся предлагается разобраться с рядом вопросов, связанных с особенностями программного обеспечения, используемого для решения тех или иных задач, с некоторыми теоретическими аспектами проблем, решение которых требует применение вычислительной техники. Для этого на лекционных занятиях обозначаются проблемы для самостоятельного рассмотрения, даются необходимые методические указания и перечень литературных источников и обсуждаются ключевые слова и фразы для самостоятельного поиска недостающих материалов в глобальной компьютерной сети.

В качестве домашних заданий обучающимся предлагается подготовить ряд рефератов по результатам ознакомления с различными темами, обсуждаемыми на лекциях, а также решить ряд проблем из реальной исследовательской практики. Эти проблемы связаны с анализом спектров ЯМР для установления структуры молекул органических веществ, с анализом сильносвязанных спиновых систем, с анализом и интерпретацией спектров ЭПР, расчётом геометрии органических молекул и анализом данных рентгеноструктурного эксперимента. Для углубления своих знаний и закрепления навыков подготовки научно-технической документации обучающимся предлагается продемонстрировать владение освоенными приёмами на примере оформления курсовой работы по результатам институтской практики. Выполнение таких заданий требует от обучающегося большой самостоятельной работы с современным программным обеспечением, мировой научной литературой и компьютерными базами.

Отличительной особенностью курса «Вычислительные методы в органической химии» является применение в нём модульной системы, при реализации которой контролируется уровень знаний аспиранта на каждом этапе. Наличие обязательных для итоговой аттестации аспиранта контрольных точек принуждает к активной работе аспиранта в течение всего семестра.

6. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы аспирантов. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины

6.1. Формы контроля.

Текущий контроль. Предусмотрена проверка знаний аспирантов в виде домашних заданий (всего 11 заданий), выполнение которых является обязательным для всех аспирантов, а результаты контроля служат основанием для выставления окончательной оценки по всему курсу в целом, при этом итоговая положительная оценка возможна только при условии наличия положительных оценок по всем предложенным задачам. Оценки за отдельные задания лектор курса выставляет экспертно

Итоговый контроль. Для контроля усвоения дисциплины учебным планом предусмотрен дифференциальный зачёт. Итоговая аттестация не предусматривает итогового собеседования в виде зачёта – любую положительную итоговую оценку за курс в целом можно получить только «автоматом», решив в установленные сроки все задания, предусмотренные Программой курса. Оценки за отдельные задания и Итоговая оценка формируется как средняя оценка за выполненные отдельные задания.

6.2. Рекомендованная литература к теоретическому курсу

Поскольку основной целью настоящей дисциплины является приобретение учащимися навыков использования современной вычислительной техники и современных программных комплексов для решения исследовательских задач, а самостоятельный поиск и отбор необходимой информации в глобальной сети должен стать одним из базовых навыков в этой сфере, аспирантам предлагается самостоятельно разыскать все требуемую литературу и вспомогательные материалы для решения предложенных задач после подробного разбора с участием лектора алгоритмов поиска информации по каждому разделу Программы.

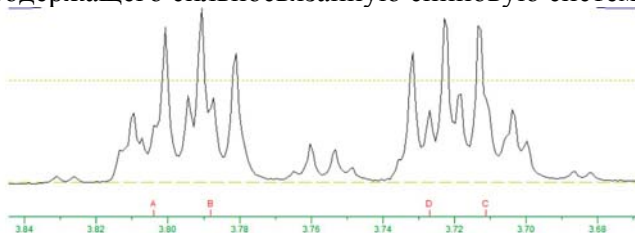
6.3. Примеры вариантов заданий

	Домашние задания:
тема 1	Реферат «Законодательство в сфере информационных технологий» основные аспекты правового регулирования, перечень законодательных актов РФ, международные конвенции, ответственность

	<p>Реферат «Системы защиты информации в компьютерных системах» проблемы защиты информации в компьютерных системах, классификация угроз, методы и средства защиты данных, методы и средства защиты каналов связи</p>
	<p>Реферат «Протоколы передачи данных в компьютерных сетях» общие представления о компьютерных сетях, уровни взаимодействия компьютеров (физический, канальный, сетевой, транспортный, сеансовый, уровень представления, прикладной), горизонтальная и вертикальная модели, обзор протоколов</p>
тема 2	<p>Реферат «Настольные издательские системы» Редакторы, процессоры, издательские системы, «desktop publishing», обзор продуктов и сферы использования, библиографические базы данных, концепция WYSIWYG</p>
	<p>Оформление собственной курсовой работы в рамках институтской практики Аспирант должен продемонстрировать разумное использование всех необходимых средств текстового процессора (автотекст, макросы, закладки, объекты, сноски, перекрестные ссылки, работа с таблицами - форматирование, сортировка, формулы; работа со стилями, сборка оглавлений и указателей, колонтитулы, водяные знаки). Выбор текстового процессора для подготовки документации остаётся за аспирантом.</p>
тема 3	<p>Реферат «Компьютерная графика в химических исследованиях и естественнонаучном образовании» Растровая и векторная графика, обзор специализированного программного обеспечения для работы с графикой</p>
	<p>Сравнить геометрические параметры молекулы, полученные экспериментально методом монокристаллической рентгеновской дифрактометрии, с расчётными данными, полученными методами молекулярной механики (MM2), полуэмпирическими квантовохимическими расчётами (AM1, MNDO, MINDO/3, PM3), неэмпирическими расчётами и расчётами по методу DFT. В этом задании аспиранту предлагается найти данные рентгеноструктурного анализа органической молекулы, наиболее близкой по структуре с теми, с которыми аспирант работает при прохождении институтской практики, в виде cif-файла (Crystallographic Information File). Выполнить анализ кристаллографических данных с использованием подходящего программного обеспечения (выбор программного комплекса остаётся за аспирантом). Выполнить теоретические расчёты геометрических параметров этой молекулы (выбор программного комплекса остаётся за аспирантом). Сравнить экспериментальные и расчётные данные.</p>
тема 4	<p>Установить строение молекулы органического соединения по данным двумерной спектроскопии ЯМР Для выполнения этого задания аспирантам предлагается скачать с указанного сервера набор двумерных спектров ЯМР некоторого органического соединения вместе со вспомогательной информацией в виде данных о брутто-формуле и дополнительных спектральных характеристиках (параметры ИК и УФ-спектров). Спектры ЯМР предлагаются обучающемуся в «сырой» (необработанной) форме в виде спадов свободной индукции. В задачу аспиранта входит подбор условий математической обработки спектров для оптимизации извлечения требуемой информации, анализ массива полученных данных в рамках поэтапно-пофрагментного анализа, формулирование гипотезы о строении предложенной молекулы и проверка гипотезы на непротиворечивость в рамках предложенного набора экспериментальных данных.</p>
	<p>Выполнить анализ указанного фрагмента предложенного спектра ядерного магнитного резонанса, определив тип сильносвязанной спиновой системы и</p>

рассчитав точные значения констант спин-спинового взаимодействия и химических сдвигов указанных сигналов.

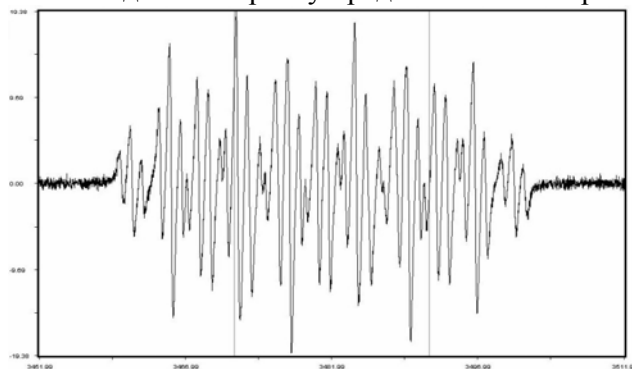
В этой задаче аспиранту предлагается для анализа фрагмент спектра ЯМР ^1H , содержащего сильносвязанную спиновую систему ABCD вида:



Спектр ЯМР предлагается обучающемуся в «сырой» (необработанной) форме в виде спада свободной индукции. В задачу аспиранта входит (1) подбор условий математической обработки спектра для оптимизации извлечения требуемой информации, (2) предварительный анализ спектра для оценки значений химических сдвигов и величин констант ССВ (с учётом закономерностей анализа систем такого рода, который обучаемый сам должен отыскивать в мировой научной литературе), (3) симуляция спектра и оптимизация параметров для получения точной сходимости расчётного и экспериментального спектров по величинам химических сдвигов и величин констант ССВ и параметрам уширения компонент сигнала. Выбор программных средств для симуляции спектров остаётся за аспирантом.

Выполнить анализ предложенного спектра электронного парамагнитного резонанса анион-радикала замещённого нитробензола, определив точные значения констант сверхтонкого взаимодействия и объяснив видимую мультиплетность сигнала.

В этой задаче аспиранту предлагается спектр ЭПР вида:



который принадлежит анион-радикалу известной структуры. Спектр передаётся в «сыром» необработанном виде. В задачу аспиранта входит (1) математическая обработка «сырых» данных для получения спектра привычного вида (см. выше) в виде первой производной сигнала поглощения, (2) предварительный анализ полученного спектра и сопоставление его с видом ОЗМО для оценки величин констант СТВ, (3) симуляция спектра и оптимизация параметров для получения точной сходимости расчётного и экспериментального спектров по величинам g-фактора, констант СТВ и параметрам уширения компонент сигнала. Выбор программных средств для расчётов и симуляции спектров остаётся за аспирантом.

Тема 5

Реферат «Языки и средства *web*-программирования»

HTML, XML, CSS, Perl, Parser, PHP, MySQL, Java, JavaScript – предназначение, области и примеры использования; CMS – устройство и предназначение, обзор наиболее популярных систем

Подготовить, отладить и разместить на одном из серверов (по указанию преподавателя) *web*-страничку, содержащую информацию химического профиля, доступную при обращении к серверу по протоколу передачи гипертекста (http).

Выбор программных средств со стороны клиента (для подготовки и отладки гипертекстовых документов), со стороны сервера (для реализации возможностей серверных приложений) и SSH-клиента (для обмена данными) остаётся за аспирантом.

6.4. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

Сайт спецкурса http://www.nioch.nsc.ru/cafedra/4k_comput/, который содержит программу курса, ссылки на Интернет-ресурсы по обсуждаемым темам.

Дополнительные материалы, включающие вспомогательные данные из новейшей научной литературы, рассылаются аспирантам перед каждым занятием по электронной почте. Аспирантам рекомендуется пользоваться Интернетом для получения новейших сведений от разработчиков в области программного и аппаратного обеспечения на соответствующих Интернет-сайтах компаний-производителей, а также электронными учебниками и руководствами.

6.5. Материально-техническое обеспечение дисциплины

В качестве технического обеспечения лекционного процесса используется проекционное оборудование и компьютерная инфраструктура Новосибирского института органической химии им. Н.Н.Ворожцова.

Для выполнения домашних заданий и самостоятельных работ в рамках курса «Вычислительные методы в органической химии» обучающимся предоставляется доступ к внутриинститутской компьютерной сети через подразделения Института, в которых они проходят исследовательскую практику, и доступ к сервисам сети *ИНТРАНЕТ*, необходимым для выполнения заданий по курсу.

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВО, принятым в ФГБУН Новосибирском институте органической химии им. Н.Н. Ворожцова Сибирского отделения Российской академии наук (НИОХ СО РАН), с учётом рекомендаций ОПОП ВО по направлению подготовки 04.06.01 «Химические науки» (Исследователь. Преподаватель-исследователь).

Автор:

профессор, д.х.н. Ткачев Алексей Васильевич

Программа одобрена на заседании Ученого совета "19" сентября 2014 г.